

DR-40**МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ СИСТЕМ
«КРЕМНИЙ-РАСТВОРИТЕЛЬ-ВИНПОЦЕТИН» И «ДИОКСИД КРЕМНИЯ-
РАСТВОРИТЕЛЬ-ВИНПОЦЕТИН»**

Ю. А. Полковникова, А. С. Леньшин

*ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», 394018, г. Воронеж, ул.
Студенческая, 3. E-mail: juli-polk@mail.ru*

Выбор компонентов лекарственной формы требует учета физико-химических факторов, влияющих на высвобождение действующих веществ, таких как температура, химический состав среды, водородный показатель [1]. Правильная интерпретация экспериментальных данных, полученных при изучении высвобождения действующего вещества из таких систем доставки, как наночастицы, невозможна без понимания физико-химических процессов на молекулярном уровне [0].

Цель исследования: изучение процесса адсорбции винпоцетина на поверхности кристаллического кремния и оксида кремния в среде воды, раствора HCl 0.01 М и фосфатной буферной смеси с pH 6.8.

Для моделирования процесса адсорбции винпоцетина на поверхности кремния и оксида кремния в различных средах предварительно были построены модели компонентов исследуемых систем и вычислены заряды их атомов квантово-химическим методом. В качестве компонентов исследуемых систем использованы модели молекулы винпоцетина в виде основания и в виде катиона, а также модели фрагментов кристаллической решетки кремния и оксида кремния. Пространственные модели компонентов были построены с использованием программы Nupur Chem 8.01 (лицензия HC80SA-4-1BBF6) [3].

В соответствии с полученными результатами установлено, что винпоцетин способен десорбироваться в воду с поверхности как кремния, так и оксида кремния. Десорбция винпоцетина в кислой среде (pH 2) с кремния и оксида кремния происходит более эффективно и с большей скоростью, по сравнению с pH 6.8 и pH 7. Характер десорбции винпоцетина с кремния и оксида кремния при pH 6.8 и pH 7 различается незначительно (в пределах погрешности результатов моделирования).

Библиографический список

1. Porous silicon nanoparticles containing neurotropic drugs / Y. A. Polkovnikova, A. S. Lenshin, P. V. Seredin [et al.]// Inorg Mater. – 2017. – V. 53(5). – P. 477-483.
2. Дёмина Н. Б. Нанотехнологические аспекты современной лекарственной формы / Н. Б. Дёмина, С. А. Скатков, А. И. Тенцова // Фармация. – 2012. – № 4. – С. 47–50.
3. Teppen J. B. HyperChem, release 2: molecular modeling for the personal computer / J. B. Teppen // J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 1992. – V. 32. – P. 757–759.